

AlN(0001)基板上における AlGa_xN 薄膜の成長様式に関する理論的検討

Theoretical investigations for growth modes of AlGa_xN thin films on AlN(0001) substrate

三重大院工, °(M2)積木伸之介, プラディプトアブドゥルミツ, 秋山亨, 中村浩次, 伊藤智徳

Mie University, °S. Tsumuki, A. -M. Pradipto, T. Akiyama, K. Nakamura, and T. Ito

E-mail: 417m611@m.mie-u.ac.jp

【はじめに】近年、AlNおよびGa_xNの混晶半導体であるAlGa_xNは、ワイドバンドギャップ(3.4~6.2 eV)半導体であることから深紫外発光デバイスへの応用が期待されている。また、分子線エピタキシー法(MBE)を用いてAlN基板にAlGa_xNをエピタキシャル成長させることで、自己組織的に量子ドットを形成することができ、高い発光効率が報告されている[1,2]。特にMBEにおいては、Al組成に依存して形成する量子ドットの密度およびサイズ等が変化し、Al組成が0.42で2次元成長と3次元成長との成長様式の変化が観測されている[1]。一方、これまでに我々は、AlN基板におけるGa_xN薄膜の成長様式に関して自由エネルギー表式を用いて表面エネルギーの面方位依存性と成長様式の関係性を明らかにした[3]。本研究では、AlN基板におけるAlGa_xN薄膜において{1103}ファセットから成る六角錐台型の3次元島の形成[4]に注目し、Al_xGa_{1-x}NのAl組成と3次元島形成の関係について原子間ポテンシャル法および自由エネルギー表式を用いて議論する。

【結果および考察】原子間ポテンシャルを用いた凝集エネルギー計算に基づきAl_xGa_{1-x}N/AlN(0001)系でのミスフィット転位の形成可能性を検討したところ、その臨界膜厚は $x=0$ 、0.25および0.5において、それぞれ7、26および40 monolayerとなり、転位形成エネルギーは2.83、4.11および4.50 eV/Åと算出された。この計算結果を用いて、自由エネルギー表式によりAlN基板上的Al_xGa_{1-x}N ($x=0, 0.25, 0.5$)薄膜における2次元転位成長(2D-MD)および3次元島成長(3D-coherent)との境界をAl_xGa_{1-x}N (0001)の表面エネルギー γ_{0001} および表面エネルギーの比 $\kappa = \gamma_{1103}/\gamma_{0001}$ の関数として表したものがFig.である。この図から、Al組成の増大に伴い3D-coherent領域が減少することがわかる。これは、Al組成の増大により基板との格子不整合度が減少して、3次元島形成時の弾性歪み減少率が低くなるためである。また、 γ_{0001} の組成依存性は10 meV/Å²程度であると考えられることから[5]、Al組成が0.42における成長様式の変化[1]は3次元島形成時の弾性歪み減少率に起因しているものと考えられる。

【参考文献】 [1] C. Himwas *et al.*, Appl. Phys. Lett. **101**, 241914 (2012). [2] C. Himwas *et al.*, J. Appl. Phys. **116**, 023502 (2014). [3] S. Tsumuki *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys., submitted. [4] B. Daudin *et al.*, Phys. Rev. B **56**, R7069 (1997). [5] T. Akiyama *et al.*, Phys. Rev. Materials, in press (2019).

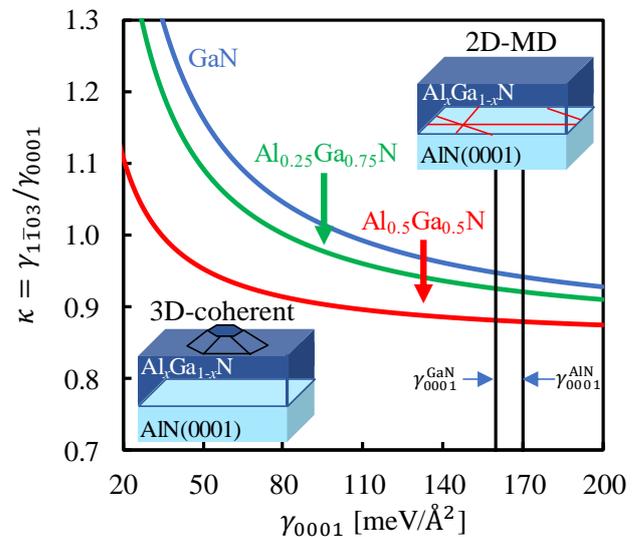


Fig. Calculated growth mode boundary for Al_xGa_{1-x}N on AlN between 2D-MD and 3D-coherent as functions of γ_{0001} and κ . Blue, red and green lines shows that Al composition x are 0, 0.25 and 0.5, respectively. Calculated surface energies of GaN(0001) and AlN(0001) under N-rich condition [5] are also shown.